

ПРОГРАММНЫЙ ПОДХОД К РАСЧЕТУ ЦЕПЕЙ НУКЛЕИНОВЫХ КИСЛОТ И БЕЛКОВОЙ МОЛЕКУЛЫ ПРИ БИОСИНТЕЗЕ БЕЛКА

Трофименко Е.Г., Издебский В.А.

Интерес к структурно-функциональной организации различных генов и, следовательно, к ДНК, все более широкое применение анализа ДНК в судебной медицине и криминалистике, четко наметившаяся в последние годы тенденция к использованию обычных либо модифицированных олигонуклеотидных блоков в качестве лекарственных препаратов, диагностических средств, проводников электричества, всевозможных наноструктур и наномеханических устройств, развитие ряда других направлений исследований молекул ДНК, включая молекулярную археологию, молекулярную палеонтологию и ДНК-компьютинг, обусловили актуальность разработки новых удобных программных средств для анализа, исследования и моделирования функционального строения нуклеотидных последовательностей, кодирующих потенциальные белки.

Целью данной работы была разработка такой программы, которая позволила бы производить расчет цепей нуклеиновых кислот и белковой молекулы на основных этапах биосинтеза белка при различных вариантах исходных данных, образное представление (отображение) пространственного соответствия кодонов и аминокислот в цепях, наглядное отображение возможных вариаций при изменении (или постоянстве) состава исходной цепи.

Пространственную структуру белка задаёт именно порядок расположения аминокислот. Количество аминокислот велико, но в белках встречается только 20 разных аминокислот. Их можно рассматривать как алфавит «языка» белковой молекулы. Для удобства эти 20 главных аминокислот обозначают символами, используя одну или первые три буквы русского или английского названия аминокислоты, например аланин – Ала или А, глицин – Гли (Gly) или G [1].



Каждый белок имеет свой неповторимый аминокислотный состав и уникальный порядок соединения аминокислот, называемый первичной структурой белка. Денатурированные белки легче усваиваются организмом, поэтому одной из целей термической обработки пищевых продуктов является денатурация белков.

Молекула ДНК в наиболее типичной конфигурации представляет собой двойную закрученную плектономически (т. е. требующую обязательного раскручивания при ее разделении на составные части) правую спираль, образованную двумя полинуклеотидными цепями. Причем, при формировании двойной спирали действует принцип комплементарности [2], согласно которому аденинам одной цепи соответствуют тимины другой, а гуанинам одной – цитозины другой и наоборот. Эти соотношения известны как правила Чаргаффа, который показал, что ДНК включает равные количества определенных азотистых осно-

ваний и вывел для двуцепочечной ДНК следующие закономерности: $A = T$, $G = C$; $A + G = C + T$; $A + C = G + T$. Все последующие работы с ДНК, независимо, молекулярная ли это биология либо другая, казалось бы, далекая от нее дисциплина, так или иначе построены на принципе комплементарности азотистых оснований.

При исследовании цепей нуклеиновых кислот и белковой молекулы на основных этапах биосинтеза белка надо учитывать свойства генетического кода [2]:

1. Триплетность – значащей единицей кода является сочетание трёх нуклеотидов (триплет, или кодон).
2. Непрерывность – между триплетами нет знаков препинания, то есть информация считывается непрерывно.
3. Дискретность – один и тот же нуклеотид не может входить одновременно в состав двух или более триплетов.
4. Специфичность – определённый кодон соответствует только одной аминокислоте.
5. Вырожденность (избыточность) – одной и той же аминокислоте может соответствовать несколько кодонов.
6. Универсальность – генетический код работает одинаково в организмах разного уровня сложности – от вирусов до человека (на этом основаны методы генной инженерии)

В разработанной программном приложении реализован простой и удобный пользовательский интерфейс средствами C++ Builder, который позволяет вводить и редактировать нуклеотидные последовательности, транслировать нуклеотидную последовательность в белковую, транслировать белковую последовательность в нуклеотидную с учетом неравномерности использования кодонов-синонимов и представлять результаты в удобном (табличном) виде. Разновидности расчетов представлены на рис. 1. Предусмотрена проверка корректности и соответствия введенных данных в диалоговом режиме.






	Осуществить расчет	Помощь
	по цепи ДНК	Ctrl+F
	по цепи ДНК	Ctrl+S
	по цепи матричной РНК	Ctrl+M
	по цепи транспортной РНК	Ctrl+T
	по цепи белковой молекулы	Ctrl+B

Рис. 1. Разновидности расчетов

Таким образом, предлагаемая программа отображает «математическую» сторону процесса биосинтеза белка и будет полезной для специалистов, различных сфер, использующих в своей работе принципы структурно-функциональной организации генов, а также научно-познавательной для обычного пользователя.

Литература

1. Чемерис А.В., Вахитов В.А. Новая старая ДНК. Уникальные черты самой главной молекулы или почему ученые разных специальностей в последнее время обращают на ДНК все больше внимания / Институт биохимии и генетики Уфимского научного центра РАН. – Уфа, 2002.
2. Шабарова З.А., Богданов А.А., Золотухин А.С. Химические основы генной инженерии. – М.: Изд-во МГУ, 1994.